Exercícios Resolvidos

Krissia de Zawadzki [FC] , Luiz Nunes de Oliveira [F]

[F] *Bacharelado em Física* [FC] *Bacharelado em Física Computacional* [BF] *Bacharelado em Ciências Físicas e Biomoleculares*

Vamos resolver abaixo alguns problemas das listas.

1. Problema 7 - Lista 2

Uma partícula no poço infinito tem a seguinte função de onda no instante inicial $t = 0$

$$\Psi(x, 0) = Ax(a - x). \tag{1}$$

a) Normalize $\Psi(x, 0)$. Esboce seu gráfico. Qual estado estacionário é o mais parecido? Nesta base, estime o valor esperado da energia.

b) Calcule $\langle x\rangle$, $\langle p\rangle$ e $\langle H\rangle$ em $t = 0$. (*Observação*: Desta vez você não pode calcular $\langle p\rangle$ tomando a derivada de $\langle x\rangle$, pois $\langle x\rangle$ é conhecido em um único instante de tempo.) Como $\langle H\rangle$ se compara à estimativa obtida em a)?

1.1 Solução

a) *Normalizando a função de onda*:
Queremos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\Psi(x, 0)|^2 = 1. \tag{2}$$

Assim, como $\Psi(x, 0)$ está definita em $0 \le x \le a$, a constante A pode ser determinada substituindo a eq. (1) em (2) e ajustando convenientemente os limites de integração. Segue que

$$\begin{aligned} \int_0^a dx\, |A|^2 x^2 (x - a)^2 &= 1 \\ A^2\, a^5 (\frac{1}{5} - \frac{1}{2} + \frac{1}{3}) &= 1 \\ A &= \sqrt{\frac{30}{a^5}}. \end{aligned} \tag{3}$$

Esboçando o gráfico da função de onda:

A função de onda tem a cara de uma parábola invertida que se anula para x = 0 e x = a. Assim, se compararmos com a função de onda $\psi_1(x)$ no primeiro estado estacionário (n=1), existe uma 'chance' de elas serem próximas entre si.

Uma forma de verificar isso é plotando as funções de onda que são soluções da parte espacial (soluções estacionárias) de $\Psi(x,t) = \psi(x) * f(t)$ no caso do poço infinito. Lembremos que a soluções estacionárias da função de onda da partícula no poço infinito são dadas por

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \qquad n = 1, 2, ..., \tag{4}$$

com energias

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} n^2 \qquad n = 1, 2, ... \tag{5}$$

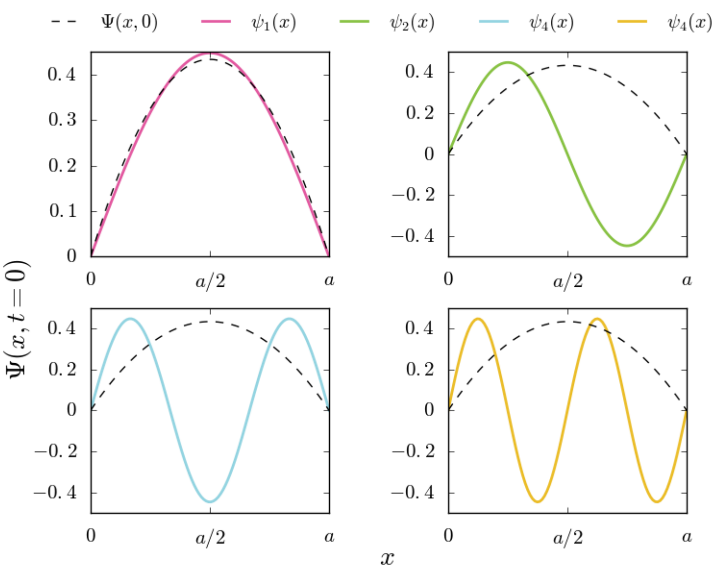

Figura 1. Estados estacionários do poço infinito – eq. (4) – (linhas cheias coloridas) e função de onda no instante $t = 0$ – eq. (1).

Da figura (1) podemos notas que $\psi_1(x)$ é muito próxima à função de onda $\Psi(x, t = 0)$ na eq. (1). Isso nos possibilita estimar qualquer observável associado a este sistema nesse estado usando os resultados que teríamos para $\psi_1(x)$!

Desse modo, o valor esperado para a energia pode ser tomado como, aproximadamente,

$$\langle E \rangle \approx E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}. \tag{6}$$

b) *Calculando valores esperados*

Para calcular o valor esperado $\langle O \rangle$ associado a qualquer observável $\hat{O}$ associado à partícula quando esta é descrita por uma função de onda $\Psi(x, t)$, fazemos

$$\langle O \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \Psi^*(x,t) \hat{O}\, \Psi(x,t). \tag{7}$$

Para o caso da posição inicial, temos

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_0^a dx\, \Psi^*(x,0) x\, \Psi(x,0) \\ &= \int_0^a dx\, A^2 x^3 (x-a)^2 \\ &= A^2 \frac{a^6}{60} \\ &= \frac{a}{2}, \end{aligned} \tag{8}$$

ou seja, a posição 'média' em que encontramos a partícula é na metade da caixa! Se voltarmos na nossa figura (1), notamos que a densidade de probabilidade é máxima quando $x = a/2$, seja com a função de onda dada pela eq. (1) ou sua parente próxima (4) com $n = 1$.

Para o valor esperado do momento $\langle p \rangle$, precisamos de uma observação. Em Mecânica Quântica, grandezas físicas estão associadas a operadores que, ao atuarem na função de onda, a modificam. O momento está associado operador $\hat{p}$ que, para sistemas unidimensionais, é definido por

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \tag{9}$$

Assim, o valor esperado $\langle p \rangle$ é calculado como segue

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_0^a dx\, \Psi^*(x,0) \; -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\, \Psi(x,0) \\ &= -i\hbar \int_0^a dx\, A^2 x(a-x)(a-2x) \\ &= 0. \end{aligned} \tag{10}$$

Note que esta solução faz sentido, pois significa que, em média, a partícula está viajando com momentos $p > 0$ e $p < 0$, que são equivalentes.

Finalmente, vamos calcular o valor esperado para $\langle H \rangle$. Recordemos o operador quântico $\hat{H}$ está associado às energias do sistema. Ele é dado por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \tag{11}$$

Logo, a quantidade que nos interessa é calculada como

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int_0^a dx\, \Psi^*(x,0) \; -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\, \Psi(x,0) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^a dx\, A^2 x(a-x)(-2) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} A^2 \frac{a^3}{3} \\ &= \frac{10\hbar^2}{2ma^2}. \end{aligned} \tag{12}$$

Voltando à nossa estimativa para a energia, eq. (6), e lembrando que $\pi^2 \approx |\vec{g}|^2 \approx 10$ [1], concluímos que nossa aproximação foi muito boa.

[1] Sim! Pelo menos, foi o que eu medi no laboratório de Física 1 em 2008 ...